

ДВУМЕРНОЕ МАКРОСКОПИЧЕСКОЕ И МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДЫ И ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ.

Никонов Э.Г., Павлуш М.¹, Поповичова М.¹

Объединённый институт ядерных исследований, Российская Федерация, 141980,
г. Дубна Московской области, ул. Жолио-Кюри, 6, +74962164722, e.nikonov@jinr.ru

¹Университет г. Прешов, Словакия, 080 01, г. Прешов, ул. Конштантинова, 16,
+421904031531, miron.pavlus@unipo.sk, maria.popovicova@unipo.sk

В различных областях науки, техники, защиты окружающей среды, строительстве, актуальными являются вопросы изучения процессов взаимодействия пористых материалов с различными веществами, находящимися в различных агрегатных состояниях. Особенно актуальными с точки зрения экологии и защиты окружающей среды являются исследования процессов взаимодействия пористых материалов с водой в жидкой и газообразной фазе. Поскольку в одном моле воды содержится $6,022140857 \times 10^{23}$ молекул H_2O , для описания свойств, например, водяного пара в поре в основном используются макроскопические подходы, рассматривающие водяной пар, как сплошную среду в рамках аэродинамики. В данной работе построена и использовалась для моделирования макроскопическая двумерная диффузионная модель [1] поведения водяного пара внутри изолированной поры.

Наряду с макроскопической моделью в работе предложена микроскопическая модель поведения водяного пара внутри изолированной поры, построенная в рамках молекулярно-динамического подхода [2]. В данной модели на основе классической механики Ньютона описывается движение каждой молекулы воды, взаимодействующей как с другими молекулами воды, так и со стенками поры. Рассматривается эволюция системы водяной пар – пара с течением времени. В зависимости от внешних по отношению к поре условий система эволюционирует к различным состояниям равновесия, которые характеризуются различными значениями макроскопических характеристик таких, как температура, плотность, давление. Сравнение результатов молекулярно-динамического моделирования с результатами вычислений на основе макроскопической диффузионной модели и экспериментальными данными позволяют сделать вывод необходимости сочетания макроскопического и микроскопического подхода для адекватного и более точного описания процессов взаимодействия водяного пара с пористыми материалами.

Литература

1. Бицадзе А.В., Калинин Д.Ф., Сборник задач по уравнениям математической физики. - М.: Наука, Главная редакция физ-мат. литературы, 1977. - 224 с.
2. Gould H., Tobochnik J., Christian W., An Introduction to Computer Simulation Methods, Chapter 8. Third edition, - Addison Valley: Pearson, 2005, pp. 267-268.